

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ УЛЬТРАКОРОТКОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ (0, 9) В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ

Авдеев Д.В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А.

Воронежский Государственный Университет, физический ф-т, каф. ФПП и МЭ
Россия, 394006, г. Воронеж, Университетская площадь, 1
Тел. 8(4732)2281160
E-mail: avdoss@bk.ru

Многие из перспективных направлений в материаловедении, микро- и наноэлектронике связываются в последнее время с фуллеренами и ультракороткими углеродными нанотрубками (ук-ОУНТ) [1, 2]. При этом, электронная структура нанотрубок в случае внешнего воздействия остается малоизученной [3]. Поэтому целью работы является теоретическое исследование зависимостей фундаментальных параметров ук-ОУНТ от длины и напряженности электрического поля.

Объектами исследования являются ук-ОУНТ (0, 9) симметрией D_3 , D_{3h}/D_{3d} длиной 0.7–2.6 нм. Интервал напряженностей внешнего электрического поля $E = 0 - 0.5$ В/Å. Метод исследования – DFT (Теория функционала плотности) [3] в приближении локальной спиновой плотности LSDA, базис 3-21*G. Расчеты проводились с использованием программного комплекса Gaussian09.

Во внешнем электрическом поле ук-ОУНТ поляризуется. С увеличением напряженности поля значения дипольного момента ук-ОУНТ длиной 2.7 нм изменяются от 0 до 170 Дебай, величина эффективного заряда находится в интервале от 0.03 до 0.065 e. В сильном электрическом поле происходит расщепление энергетических уровней, вследствие эффекта Штарка. Величина смещения вниз энергии низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО) ук-ОУНТ D_3 и D_{3h}/D_{3d} симметрии составляет 0.1 и 0.2 эВ, 0.5 и 0.7 эВ в электрическом поле напряженностью 0.2, 0.5 В/Å соответственно. Величина зазора между граничными орбиталями при напряженности $E = 0.5$ В/Å изменяется от 0.32 до 0 эВ (D_3 симметрия) и от 0.7 до 0.01 эВ (D_{3h}/D_{3d} симметрия). Т.о., в сильном электрическом поле происходит индуцированный переход полупроводник–металл, что может использоваться для создания электронных ключей, бесконтактных датчиков напряженностей электрического поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №14-02-31315 мол_а.

Литература.

1. Sanchez-Valencia J. R., et al. Controlled synthesis of single-chirality carbon nanotubes // *Nature Letters*. **Vol. 512**, 2014, p. 61.
2. Liu L., et al. Ultrashort Single-Walled Carbon Nanotubes in a Lipid Bilayer as a New Nanopore Sensor // *Nature Comm*. **Vol. 4**, 2013, p. 3989.
3. Kim C., et al. Observation of ultraviolet rotational band contours of the DNA base adenine: Determination of the transition moment // *Phys. Rev. B*. **Vol. 65**, 2002, p. 165418.